Transport Canada
Transports Canada

Development
Développement

TP 4198

Modelling the Response of an LPG-Carrying Rail Tank Car to an External Fire Environment

Summary Report

Prepared for the
Transportation
Development Centre
Transport Canada

November 1982

CA1
DTC 845
82
M56
c.2

TP 4198

MODELLING THE RESPONSE OF AN LPG-CARRYING RAIL TANK CAR TO AN EXTERNAL FIRE ENVIRONMENT

SUMMARY REPORT

Prepared For:

TRANSPORT CANADA TRANSPORTATION DEVELOPMENT CENTRE

Prepared By:

DAVIS ENGINEERING LIMITED
CONSULTING ENGINEERS
OTTAWA, CANADA

Library and Information Centre/
Centre de Documentation (CSLA)
CU LE
JUIL 25 1983
JULY
Transport Canada / Transports Canada

NOVEMBER 1982

REPORT DOCUMENTATION FORM

1. Transport Canada Report No.	2. TDC Project No.	3. Recipient's Catalogue No.
TP 4198	4559	

4. Title and Subtitle	5. Report Date
Modelling the Response of an LPG-Carrying Rail Tank Car to an External Fire Environment: Summary Report	November 1982
	6. Performing Organization Report No. C81-139
7. Author(s)	8. Transport Canada File No.
Currie, T., and Millar, D.A.J.	D 1465-302-6-2
9. Performing Organization Name and Address	10. DSS File No.
Davis Engineering Limited, 1481 Cyrville Road, Ottawa, Ontario K1B 3L7	11SD.T8200-1-1559
	11. DSS or Transport Canada Contract No. OSD81-00158
12. Sponsoring Agency Name and Address	13. Type of Report and Period Covered
Transportation Development Centre, 1000 Sherbrooke Street West, Suite 2421, Montreal. Quebec H3A 2R3	Technical
	14. Sponsoring Agency Code TDC 4559
15. Supplementary Notes	16. TDC Project Officer
	D. Dibble

17. Abstract

Thermal, thermodynamic and structural models of an LPG-carrying rail tank car exposed to either an enveloping pool fire or an impinging torch fire are described in this report. Both unprotected tanks and tanks equipped with EXPLOSAFE foil and/or thermal insulation are modelled. The finite-difference method is adopted to analyse the heat flow inside the tank car. A sample computer program implementing the proposed numerical procedures is included.

The proposed thermodynamic model, which predicts changes in the state of the lading, permits the liquid in the tank to be non-isothermal.

The proposed structural model of a tank car in a fire uses a stress-rupture approach to predict failure since creep will be significant if the tank shell is exposed to high temperatures for a prolonged period of time.

The structure of the proposed computer model and the method of implementation is described.

18. Key Words	19. Distribution Statement
Rail Tank Car, LPG, Pool Fire, Torch Fire, Thermal Computer Model Failure, BLEVE	Copies available from TDC.

20. Security Classification (of this report)	21. Security Classification (of this page)	22. No. of Pages	23. Price
Unclassified	Unclassified	19	

TDC CDT 79 005

TABLE OF CONTENTS

1.	INTRODUCTION	1
2.	SCOPE OF THE MODEL	3
3.	MODEL STRUCTURE	5
	3.1 Thermal Models	5
	3.2 Thermodynamic Models	5
	3.3 Structural Models	5
4.	THERMAL MODELLING FOR TRANSIENT HEAT TRANSFER	6
	4.1 Conduction	6
	4.2 Radiation	9
	4.3 Convection	9
5.	THERMODYNAMIC MODELS	12
	5.1 Pre-venting Models	12
	5.2 Post-venting Thermodynamic Models	14
6.	STRUCTURAL MODEL	17
7.	CONCLUSION	19

LIST OF FIGURES

Figure 1	Global (X-Y-Z) and Tank Car Centered (r-θ-z) Coordinate Systems Showing Tank Car Roll and Pitch Angles, γ and α.	2
Figure 2	Peak Wall Temperature vs Time All Tests	4
Figure 3	Finite-Difference Grid Superimposed on Tank Car Cross-Section	7
Figure 4	Azimuthal Mesh Structure for Torch Fire Analysis	8
Figure 5	Vapour Velocity Distribution in a Tank with Two Relief Valves	11
Figure 6	Comparison of Recorded Pressure in Tank Car RAX 201 with the Saturation Pressure of Pure Propane	13
Figure 7	Growth of Isothermal Surface Layer	16
Figure 8	Larson-Miller Plot of Stress-Rupture Data Given in Table 4-2 (for TC-128-B steel)	18

1. INTRODUCTION

The production of a simulation model for a complex physical situation like that of a propane tank car immersed in a fire involves the simultaneous development of a group of mathematical models of the components, of the processes, and of their interactions, and of the strategies to be used to produce a useful prediction of the behaviour of the simulation model using these mathematical descriptions. The usefulness of the prediction must be judged by the fidelity with which the simulated behaviour follows that of the actual physical system for which detailed measurements have been made. In order to improve this fidelity, highly sophisticated mathematical models appear to be needed, but enthusiasm for mathematical complexity must be tempered by the need to produce a cost-and-time-effective solution to the analysis.

The simulation model proposed and described in this report incorporates mathematical models which account for the primary and secondary factors affecting the behaviour of the modelled system, together with solution strategies which can be implemented on any medium or large scale mainframe computer, using proven numerical techniques. Consequently, a computer program based on this report should be "portable", and capable of useful predictions of tank car behaviour in a fire.

A number of areas where insufficient information is known about the properties or behaviour of components to permit definition of a completely satisfactory model are identified. In addition, some factors are discussed which have been omitted as probably of tertiary importance but which may have to be reconsidered for later inclusion.

The resulting computer program should therefore provide results of sufficient fidelity to be immediately applicable in the analysis of a variety of tank car types, with various degrees of thermal protection, having any probable attitude (Fig. 1) in different types and intensities of fires. While further development of the models may be required as a result of further experimental data, it is believed that all the available useful and pertinent factors have been adequately accounted for in this model. The most significant region of doubt at present surrounds the mechanism by which EXPLOSAFE modified the thermal behaviour of the tank, as will be discussed later.

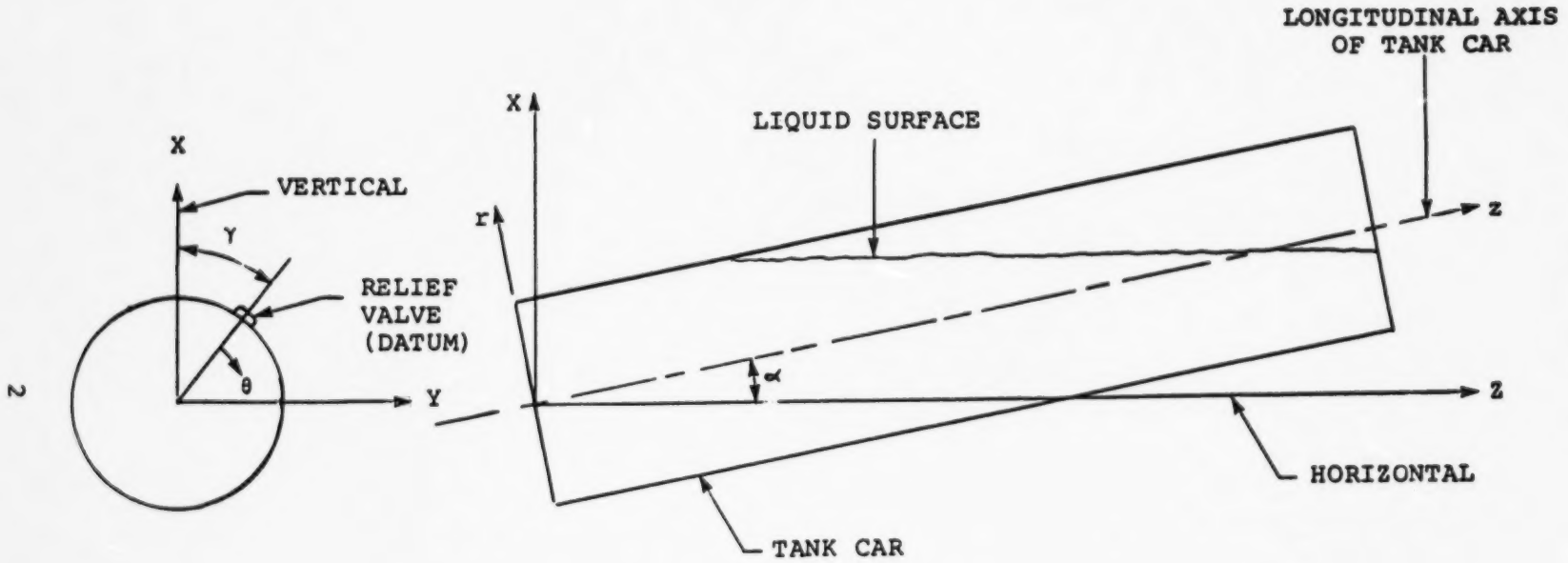


Figure 1 Global (X-Y-Z) and Tank Car Centered (r-θ-z) Coordinate Systems Showing Tank Car Roll and Pitch Angles, γ and α.

2. SCOPE OF THE MODEL

The first objective of the program to be based on this model is to predict the pressure-history within a railroad LPG tank car, or a scale model, following immersion in a pool fire or impingement of a torch flame, together with the temperature-history at a number of locations in the tank wall. The second objective is to deduce whether or not the tank wall will fail, and if it does, the location and time of failure, together with the mass of propane remaining in the tank at that time. Typical tank wall temperature histories are shown in Fig. 2, which were measured during the 1/5 scale tests at DRES.

The model of the tank car permits consideration of external and internal passive thermal protection (non-ablative), and also permits specification of tank car attitude in pitch and roll. Either a spatially uniform flame temperature can be specified for a pool fire, or different temperatures can be specified at different locations around the tank. In the case of a torch fire, the torch velocity, temperature, and distance from the tank can be specified.

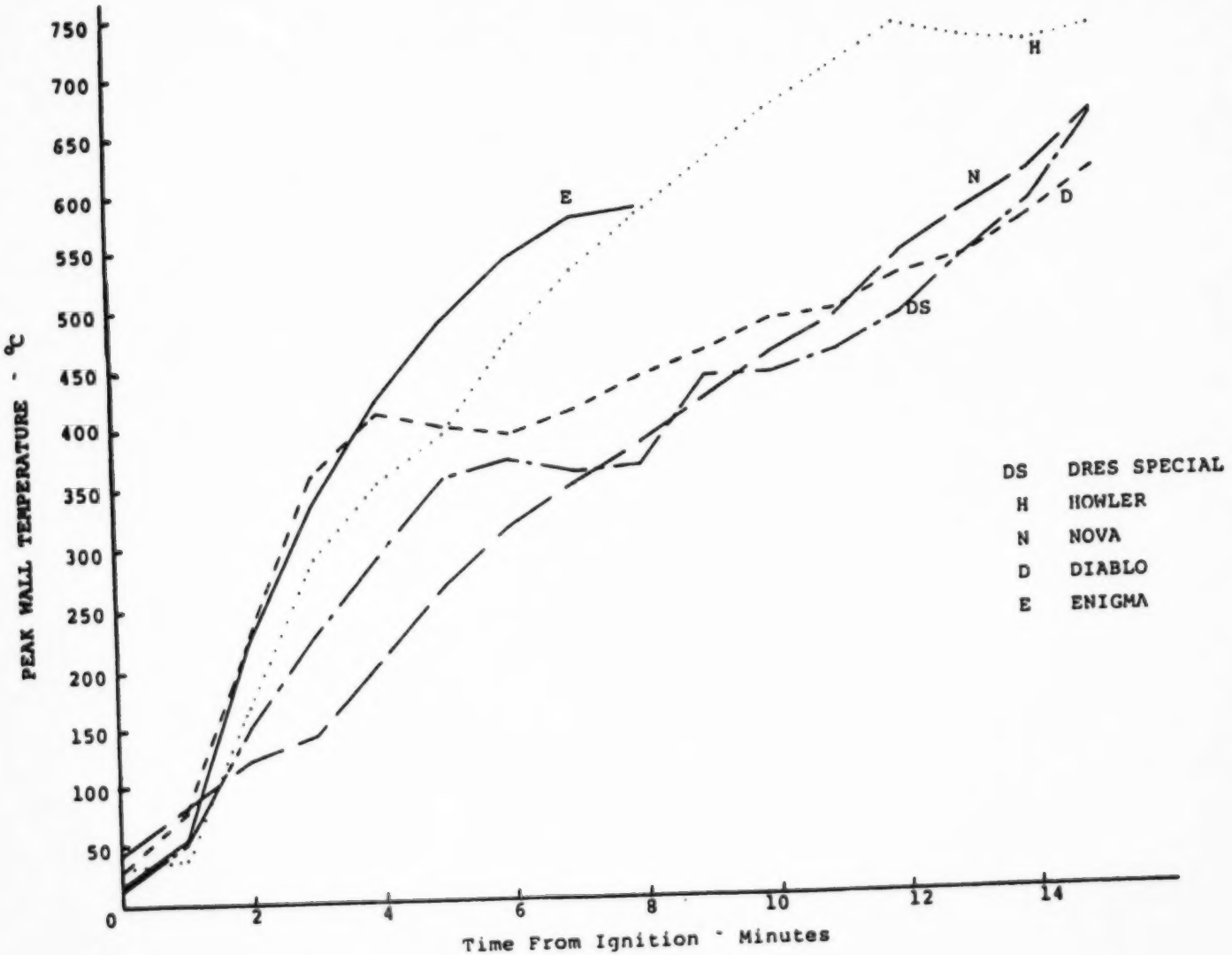


Figure 2 Peak Wall Temperature vs Time All Tests

3. MODEL STRUCTURE

The overall simulation model requires three types of sub-models to be developed. These models are described as follows.

3.1 Thermal Models

The thermal models incorporate the geometric and heat transfer characteristics of the tank car, and its contents, and of the fire to which it is exposed. They describe the heat transfer mechanisms, and their interaction, the boundary conditions, and the techniques by which all these can be handled in a computer for solution of the equations involved.

3.2 Thermodynamic Models

The thermodynamic models describe the P-V-T characteristics of the liquid and vapour propane, and the fractions of each in the tank. They also include models of the temperature stratification in the liquid and the consequence of this stratification on the average density of the liquid and the tank pressure. The flow rate through the safety valve if initially liquid and initially vapour propane is also described by these models.

3.3 Structural Models

The structural models describe the behaviour of the tank wall as a result of the temperatures and pressures generated by the fire. In particular, these models provide a method for predicting tank wall failure.

For each of the first two types of model, the effects of adding thermal protection are considered, so that these models vary somewhat as the configuration changes from plain to protected tank. In addition, the thermodynamic models change when the safety valve opens, since the thermodynamic system goes from closed to open when this happens.

4. THERMAL MODELLING FOR TRANSIENT HEAT TRANSFER

4.1 Conduction

A finite difference representation of the 3-D transient, heat transfer equations in cylindrical coordinates will be used with a finite difference mesh of nodal points. Fig. 3 shows the finite difference grid at one axial section, superimposed on the tank car. The explicit, implicit and Crank-Nicholson techniques for expressing these finite differences were examined. The time step size for stability of the solution for the explicit formulation was found to be too small for practical solution times, though this method required only modest core storage. A full 3-D implicit method, involving simultaneous solution of an equation for every nodal point, will require excessive core storage for most situations of interest, but by ignoring the longitudinal conductions (in comparison with radial and circumferential), core storage requirements for any realistic model could be accommodated in any medium or large computer. The Crank-Nicholson formulation had been shown to develop bounded oscillatory solutions, which are considered unacceptable for these purposes.

For these reasons, the implicit formulation of the finite difference operations has been selected, for all pool fire analyses, with longitudinal conductivity set to zero, so thermally decoupling adjacent r-θ planes in the solution. Since longitudinal temperatures gradients will be small, and longitudinal convection also for small pitch angles, this simplification should not seriously impair the fidelity of the solution.

For torch fires, the solution method will depend on the size of the torch. A torch generated by a venting safety valve on a nearby tank car will completely envelope the subject tank, and the solution method will be that used for pool fires. For a small torch fire, a full 3-D method will be used, with the implicit formulation for unprotected tank cars, for which a fairly coarse grid can be used. The azimuthal mesh structure for the torch fire is shown in Fig. 4. However, for a small torch fire impinging on an insulated and/or EXPLOSAFE protected tank car, the implicit method requires excessive storage, and an explicit method must be used, despite the long solution time required.

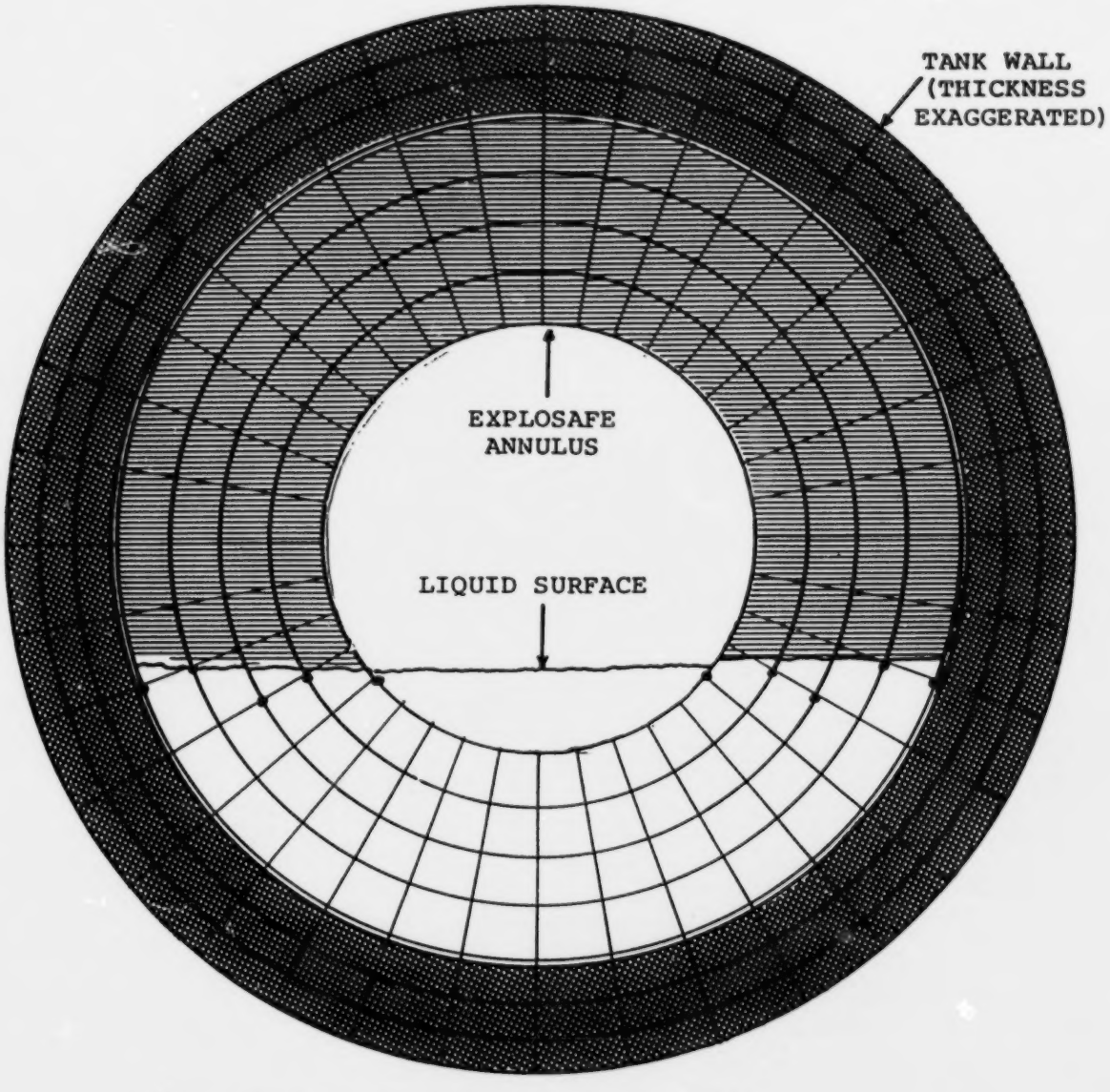


Figure 3 Finite-Difference Grid Superimposed on Tank Car Cross-Section

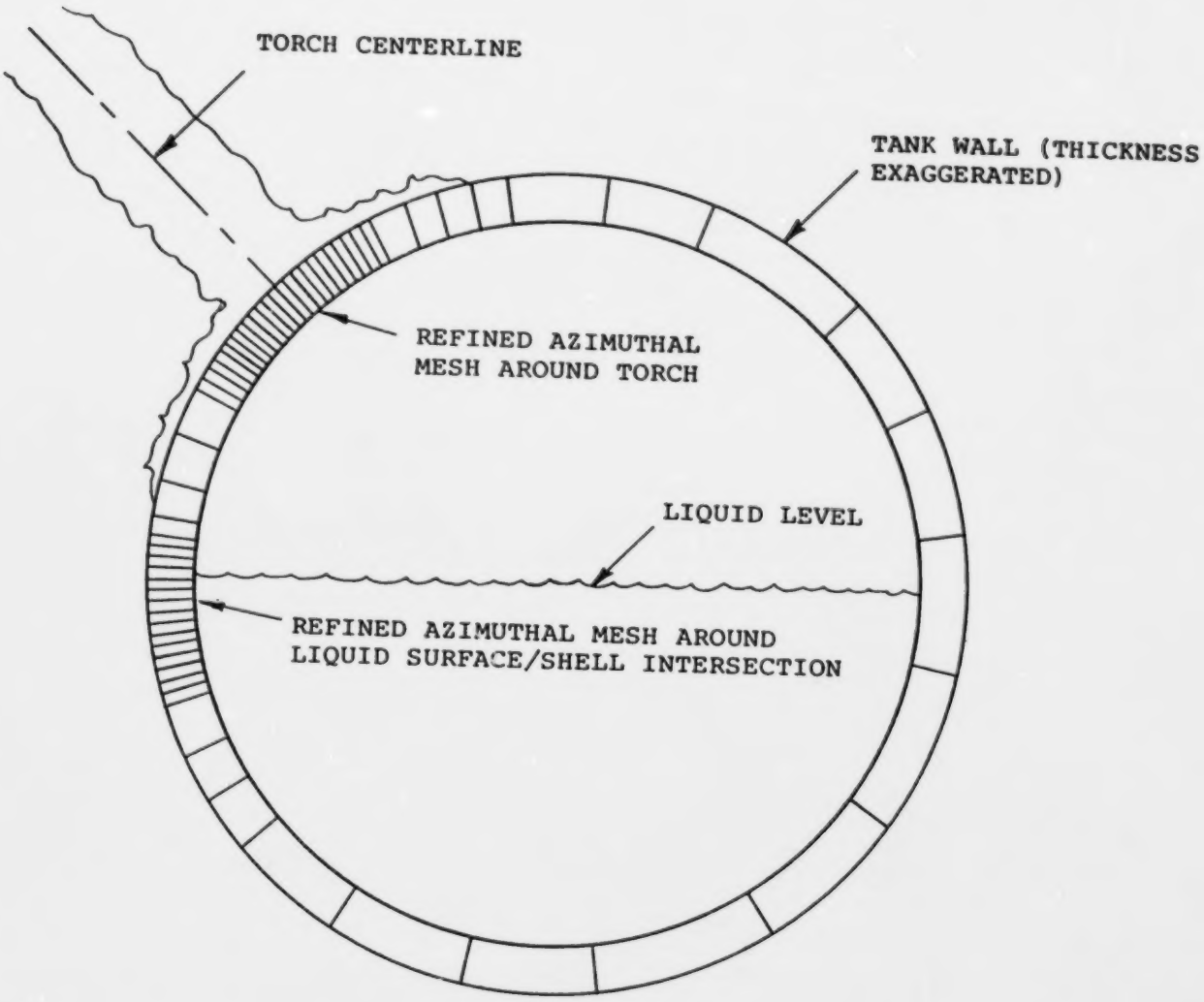


Figure 4 Azimuthal Mesh Structure for Torch Fire Analysis

In all of these solutions, the user will have considerable freedom to specify grid spacing, including variable spacing to maintain accuracy in regions with steep temperature gradients. For thermally protected tanks, the geometry and thermal properties of the insulation and EXPLOSAFE, must be supplied by the user. For EXPLOSAFE, which is highly anisotropic, the conductivities in the three principal directions are very different. However, analysis and experiments by DE have shown how these can be evaluated, and values for one sample of the material are given.

4.2 Radiation

The major radiation model is for the flame to tank external surface. Examination of the literature showed that the flame could be considered as opaque and "gray"; with an emissivity near 1, and since it envelopes the tank, the radiant heat flux can be readily determined if the flame and surface temperatures are known. Flame temperature must be specified by the user, and can be spatially uniform or varied from node to node of the tank surface.

The significance of radiation from the hot, dry inside surface of the tank to the liquid surface was examined, including the effects of absorption by the intervening vapour. This radiation is significant, though substantially smaller than the external radiation from the flame. Since the calculation of the radiation including "self-irradiation" of the inner tank surface is complex, the radiative flux is calculated assuming the dry tank surface is isothermal, so radiates only to the propane. The absorption by the vapour is ignored, since it accounts for a little more than 10% of the radiation leaving the tank surface.

The effect of radiation when the tank is lined with EXPLOSAFE is also considered, and it is shown that it can be neglected, with the possible exception of the case when the foil layers are applied cylindrically.

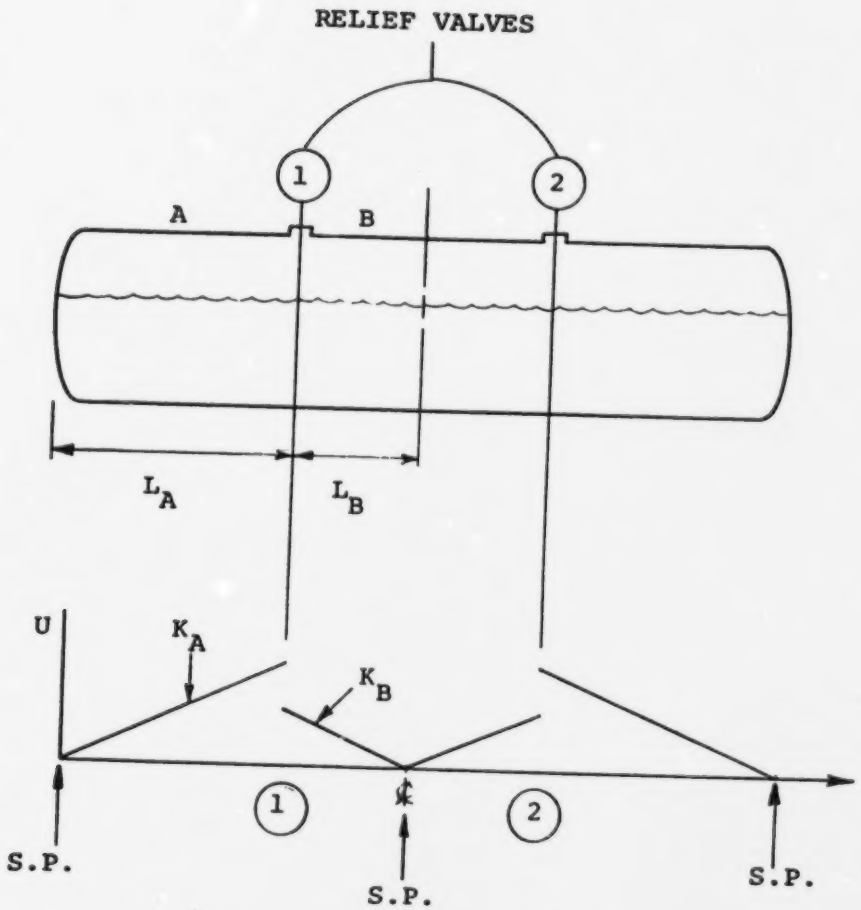
4.3 Convection

Convection from the flame to the tank has been critically examined. Though the convective heat flux is small compared to the radiative flux, a method for predicting its value has been developed. A small variation with circumferential location is predicted, but this will be ignored in view of the dominance of the radiation flux (and the certainty in the effective flame temperature for that radiation).

Convection within the liquid propane is not modelled. When the liquid is non-isothermal, during the initial ten minutes or so of a typical fire, the liquid is stratified so as to inhibit convection in the bulk of the liquid, and the main effect of the convection at the tank wall is to generate this stratification. The stratification itself is dealt with by the thermodynamic model on an empirical basis.

Similarly, in the vapour space the vapour is stratified so as to inhibit natural convection, so that this mechanism is ignored within the propane. However, the effect of forced convection as vapour flows to the safety valve when that valve is open is considered and evaluated. The velocity distribution in the vapour space in a tank with two relief valves is shown in Fig. 5. The effect on tank wall temperature is small, but the effect on the venting rate is significant since the vapour entering the valve will be superheated.

A final convective mechanism may need consideration if, as seems likely, the protective effect of EXPLOSAFE cannot be duplicated in the model using conductive effects alone. This mechanism is the pulsating convection developed as the tank pressure oscillates as a result of the safety valve opening and closing. This may turn out to be a significant mechanism for cooling the dry tank wall during the early part of the fire. Convection within the EXPLOSAFE under steady pressure conditions is likely to be completely inhibited by the resistance of the mesh to fluid flow.



S.P. - STAGNATION POINT

Figure 5 Vapour Velocity Distribution in a Tank with Two Relief Valves

5. THERMODYNAMIC MODELS

5.1 Pre-venting Models

Before the safety valve opens, all heat additions to the lading increase its internal energy. During this period, the void fraction decreases and if the initial fill was much in excess of 85% the tank may become shell-full (no vapour). The void fraction, hence the liquid level, is determined by the interal energy; the total mass is known and for a given internal energy, the mass of liquid and vapour in equilibrium can be found. However, the liquid is generally temperature (and density) stratified, so that the evaluation of the internal energy must be by integration, rather than summation.

The temperature gradient in the stratified liquid cannot be predicted from first principles, so it is input by the user, based on experimental values reported for similar situations.

Examination of the pressure-temperature history of a typical test showed that the early opening of the pressure relief valve (typically two minutes after the fire starts) is due, not to the propane, but to the ethane and propylene mixed with it. The higher vapour pressure of these lighter hydrocarbons produced a much higher total pressure than the propane saturation pressure. However, within a few minutes, these fractions boil off and are vented, as shown (in Fig. 6) by the vapour pressure of the propane becoming equal to the measured tank pressure. Since this "pressure-excess" occurs while the tank wall is cold, its effect on the tank structure and life is insignificant, and the DE model will assume pure propane for the lading. The computer model will therefore not duplicate this early valve opening. (A simple method which will produce this effect has been developed, and can be incorporated if the user feels that this degree of fidelity is required.)

One of the main duties of the thermodynamic model is to provide the liquid surface level as a function of time. If thermal equilibrium is obtained, this could be achieved by determining the mass ratio of saturated liquid to vapour which yielded the correct internal energy, known from the thermal analysis. However, for the first ten minutes or so of a test of an unprotected tank, the liquid is stratified, being much

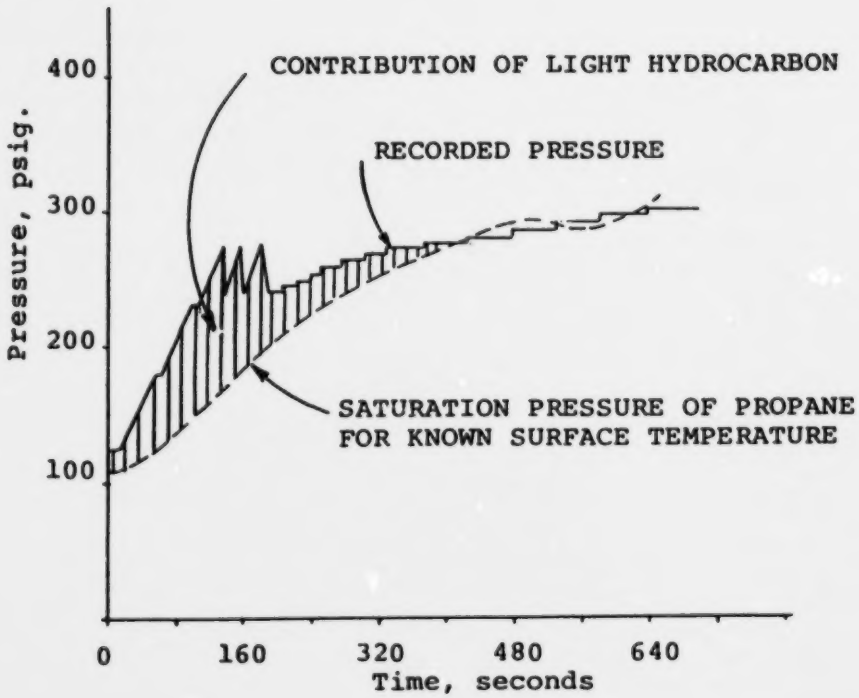


Figure 6 Comparison of Recorded Pressure in Tank Car RAX 201 with the Saturation Pressure of Pure Propane

hotter at the top than lower down. No method for predicting the degree of stratification was found, but some empirical relations were developed from the limited test data available, and the model requires that the temperature gradient be input by the user. This gradient is assumed to apply at the surface until venting occurs, and to extend further down into the liquid as heat is added to the system by the fire. The fraction of the energy added which goes to increase the energy of the liquid is also user specified.

The vapour is assumed to be isothermal and saturated except for the boundary layer along the tank surface; this superheated vapour is considered only in determining the enthalpy of the vapour leaving the safety valve, so does not enter into this pre-venting thermodynamic model.

With these constraints, the liquid depth can be determined uniquely, though with some difficulty, given the surface temperature. The internal energy of the lading can also be evaluated, using the saturation value of liquid specific internal energy in the absence of sub-cooled liquid data. Hence a table can be prepared, prior to the start of the thermal analysis, giving the liquid depth, lading energy and tank pressure as functions of the liquid surface and vapour temperature. This table can then be used to determine the liquid level from the results of the thermal model analysis at each time stop.

The only modifications to this model required when EXPLOSAFE is installed is the very minor change in heat capacity and volume introduced by the EXPLOSAFE itself, and the effect of superheating the EXPLOSAFE, and vapour in the EXPLOSAFE, to the temperatures calculated for the EXPLOSAFE modes. This last effect will be handled as an apparent decrease in energy supplied to the lading from the fire.

5.2 Post-venting Thermodynamic Models

Two types of models are needed for the period following opening of the relief valve: a model for the open system itself; and a model for the flow rate through the valve.

For the open system, the unsteady energy equation is used instead of the closed system equation to determine the internal energy of the tank contents. The user-specified, liquid surface temperature gradient as just described is used to describe the liquid stratification, except that it applies

to the liquid between two isothermal layers, as shown in Fig. 7. The top layer is at the saturation temperature corresponding to the tank pressure, the bottom layer is at the initial lading temperature, and the middle layer is stratified at the prescribed gradient. The addition of energy from the flame moves this middle layer down through the liquid until the bottom layer is "consumed"; finally, the whole of the liquid becomes isothermal.

When both liquid and vapour are isothermal, and saturated, the liquid depth is readily determined from the system internal energy. This in turn depends on the rate at which mass and enthalpy are leaving the tank through the safety valve.

The flow rate through the safety valve depends on whether the valve is submerged or not; this is determined by liquid level and tank attitude. When the valve is fed with vapour, it is assumed no condensation occurs in the valve, and the flow is assumed to be choked. From the literature, a flow coefficient for a typical safety valve is taken to be 0.87. The flow rate is then determined from the stagnation state of the vapour entering the valve. The stagnation temperature is determined from the saturation value plus the increment produced by the heat entering the vapour through the tank wall.

When the valve is submerged, a two-phase flow leaves the valve, and the flow rate depends on the extent to which thermal equilibrium is maintained as the fluid pressure drops on the way through the valve. Because this expansion is relatively gradual through a typical valve, and the hardware of the valve promotes vapour production, the assumption of equilibrium flow appears to predict reasonably accurate flow rates. The literature provides data for critical equilibrium mass flux as a function of stagnation pressure, and also flow coefficients for the valves most commonly used. The user must supply a curve of valve area as a function of applied pressure.

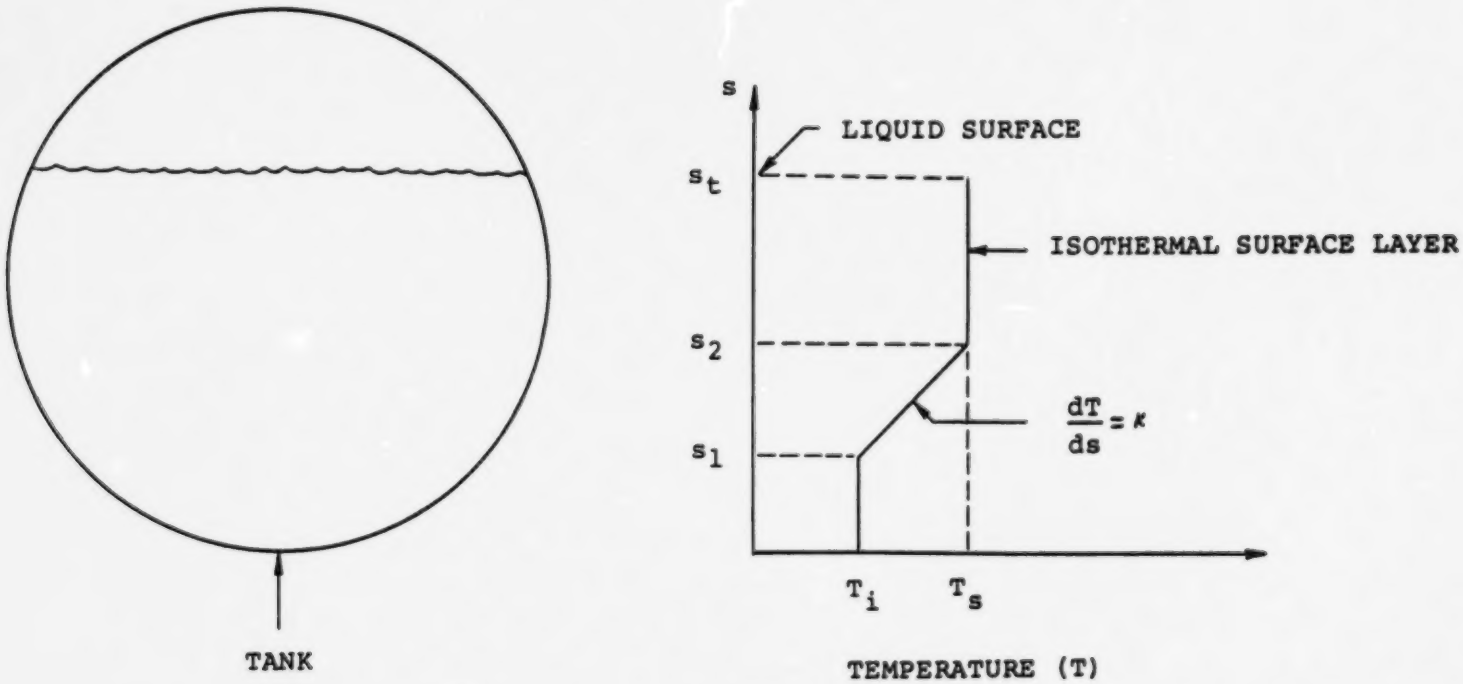


Figure 7 Growth of Isothermal Surface Layer

6. STRUCTURAL MODEL

The purpose of the structural model is to determine whether or not the tank wall will fail, and if so where and when. To do this, a failure criterion must be selected, and applied at either preselected nodes in the wall, or at all nodes with a temperature higher than some preselected value.

Three failure criteria were selected as applicable, and two have been proposed for use as models. The von Mises failure criterion, based on maximum distortion energy, would be applicable if the failure is expected to be due to exceeding the ultimate strength of the tank wall steel. The incremental Larson-Miller correlation technique would be used for creep/stress-rupture failures. Since, in fact, any high temperature failure, including an "ultimate strength" failure, can be correlated by the Larson-Miller technique (shown in Fig. 8) that failure criterion should be adequate for both. However, the test duration for a high temperature tensile test is usually not provided, so that the extension of the Larson-Miller correlation to short times is usually inaccurate, and it is proposed that both criteria be applied, and the first to predict failure be used.

The stresses to be tested by these failure criteria are those generated by the pressure - the hoop and longitudinal stresses in the cylindrical wall. Thermal stresses are ignored since plastic deformation will occur before failure of any tank steel, and thermal stresses will be relieved in such deformation.

The design of the end bells of the tanks and their method of manufacture has been examined in conjunction with their stress analysis. It was concluded that failure will almost always occur in the cylindrical wall before the end ruptures, and this is borne out by test results. Consequently, though a simple stress analysis technique was proposed for the end bells, this will not be implemented in the initial model.

A finite element analysis method was examined critically for application to this problem. It was concluded that this would have to be a very sophisticated version of such a program, including large strains, large distortion and plastic deformation and temperature dependent properties. Though such programs exist, they require large computers and are expensive to run. Inclusion of such a method would limit portability of the program, and would demand advanced stress-analysis skill of the user. Such an option was rejected for the initial version of this simulation.

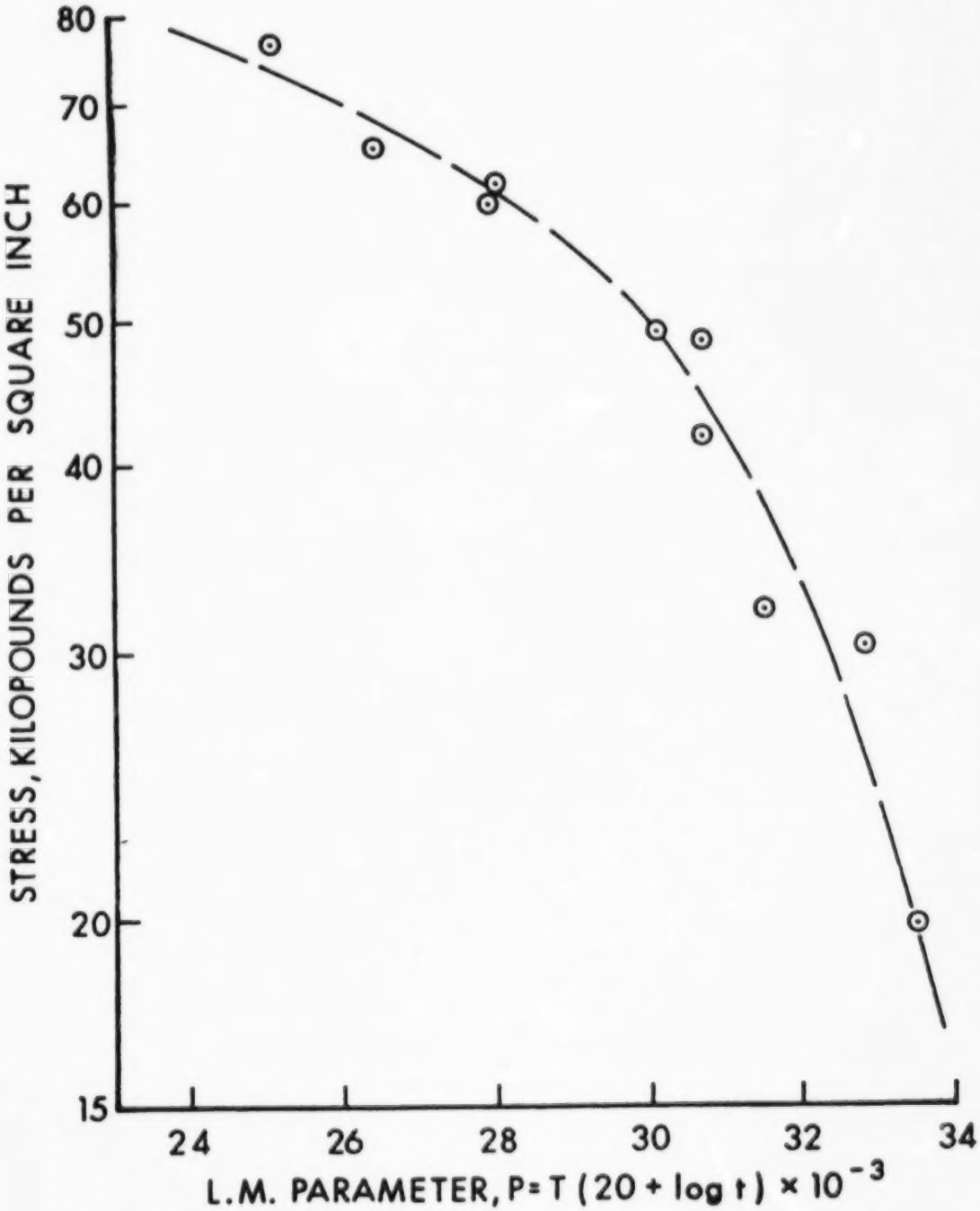


Figure 8 Larson-Miller Plot of Stress-Rupture Data Given in Table 4-2 (for TC-128-B steel)

T - temperature; t - life (time)

7. CONCLUSION

The simulation model just described is thought to be sufficiently advanced to provide adequately faithful simulation of almost all likely tank car/fire situations. User-input and intervention has been kept to a minimum, and input quantities have been chosen, where possible, to be those most obtainable by the user. For example, the flame temperature is input rather than the surface heat flux.

The model is considerably more sophisticated that the currently available knowledge of the phenomena involved. However, this permits the user to examine which of these phenomena are most important, to initiate research to illuminate them, and to incorporate the research results without major rebuilding of the program.

Transports Canada
Développement

Transport Canada
Development

TP 4198

Reproduction du comportement d'un wagon-citerne de gaz de pétrole liquide (GPL) exposé à un incendie

Rapport sommaire

Préparé pour le
Centre de développement
des transports
Transports Canada

novembre 1982

TP 4198

REPRODUCTION DU COMPORTEMENT D'UN WAGON-CITERNE DE GAZ DE PETROLE LIQUIDE (GPL) EXPOSE A UN INCENDIE

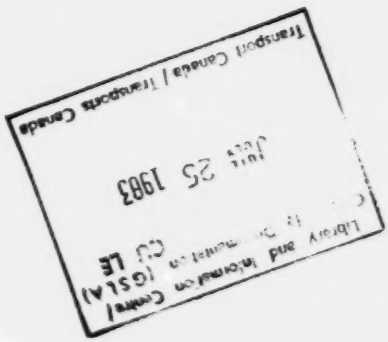
RAPPORT SOMMAIRE

Réalisé Pour:

LE CENTRE DE DEVELOPPEMENT DES TRANSPORTS
TRANSPORTS CANADA

Par:

DAVIS ENGINEERING LIMITEE
INGENIEURS-CONSEIL
OTTAWA, CANADA


Transport Canada / Transports Canada
JUIL 25 1983
Library and Information Centre (GSLA)
CU LE

NOVEMBRE 1982

LE CONTENU DU PRÉSENT RAPPORT NE REFLÈTE QUE LES OPINIONS DE L'AUTEUR ET NE SAURAIT EN AUCUN CAS ENGAGER LES POLITIQUES ET POSITIONS OFFICIELLES DU CENTRE DE DÉVELOPPEMENT DES TRANSPORTS, TRANSPORTS CANADA.

FORMULE DE DOCUMENTATION POUR RAPPORT

1. N° du rapport Transports Canada	2. N° de l'étude — CDT	3. N° de catalogue du destinataire
TP 4198	4559	

4. Titre et sous-titre	5. Date du rapport
Reproduction du Comportement d'un Wagon-Citerne de Gaz de Pétrole Liquide (GPL) Exposé à un Incendie: Rapport Sommaire	Novembre 1982
	6. N° du rapport de l'organisme exécutant: C81-139
7. Auteur(s): Currie, T., and Millar, D.A.J.	8. N° de dossier Transports Canada: D 1465-302-6-2
9. Nom et adresse de l'organisme exécutant: Davis Engineering Limitee, 1481 Cyrville Road, Ottawa, Ontario K1B 3L7	10. N° de dossier — ASC: 11SD.T8200-1-1559
	11. N° de contrat — ASC ou Transports Canada: 0SD81-00158
12. Nom et adresse de l'organisme parrain: Centre de développement des transports, 1000 rue Sherbrooke ouest, Montréal, Québec H3A 2R3	13. Genre de rapport et période visée: Technique
	14. Code de l'organisme parrain: CDT 4559
15. Remarques additionnelles	16. Agent de projet — CDT: D. Dibble

17. Résumé

Ce rapport décrit les modèles mathématiques représentant les contraintes thermiques, thermodynamiques et structurelles s'exerçant à l'intérieur d'un wagon de chemin de fer transportant du gaz de pétrole liquéfié, et soumis à l'action de flammes soit enveloppantes, soit à effet torche. Cette modélisation a voulu figurer des wagons standards et des wagons équipés du système de protection EXPLOSAFE ou d'un calorifugeage ordinaire, ou des deux. L'analyse des flux thermiques à l'intérieur des wagons a été faite par la méthode des différences finies. Le rapport renferme un spécimen du programme informatique mettant en oeuvre la méthodologie numérique proposée.

Le modèle thermodynamique envisagé prend en compte les variations dans l'état du chargement, et permet de la sorte d'éviter une représentation simplement isotherme du fluide véhiculé.

Pour le modèle devant figurer l'état de la structure d'un wagon soumis à l'action des flammes, l'approche suivie pour prédire l'imminence d'une défaillance a été celle du rapport entre les contraintes en jeu et les caractéristiques de rupture des matériaux, étant donné que le fluage devient un facteur important lorsque le corps du wagon est soumis pendant longtemps à des températures élevées.

Enfin ce rapport décrit le processus mathématique utilisé et explique la mise en oeuvre du modèle suggéré.

18. Mots-clés	19. Diffusion
Wagon-citerne, Gaz de pétrole liquéfié, Flammes enveloppantes, Flammes à effet torche, Modélisation des flux thermiques, EXPLOSAFE	Un nombre limité d'exemplaires est disponible au CDT.

20. Classification de sécurité (de ce rapport)	21. Classification de sécurité (de cette page)	22. Nombre de pages	23. Prix
AUCUNE	AUCUNE	20	

CDT TDC 79-005

TABLE DE MATIÈRES

1.	INTRODUCTION	1
2.	OBJET DU MODÈLE	3
3.	STRUCTURE DU MODÈLE	5
	3.1 Modèle thermique	5
	3.2 Modèle thermodynamique	5
	3.3 Modèle structural	5
4.	REPRODUCTION THERMIQUE DU TRANSFERT TRANSITOIRE DE CHALEUR	6
	4.1 Conduction	6
	4.2 Radiation	9
	4.3 Convection	10
5.	MODÈLES THERMODYNAMIQUES	12
	5.1 Modèles avant ouverture de la valve	12
	5.2 Modèles après ouverture de la valve	15
6.	MODELE STRUCTURAL	17
7.	CONCLUSION	20

INDEX DES FIGURES

figure 1	Systèmes de coordonnées terrestres (X,Y,Z) et de référence du wagon (r,θ,z) mettant en évidence les angles de roulis et de tangage, γ et α.	2
figure 2	Évolution de la température maximale de la paroi en fonction du temps (pour tous les tests)	4
figure 3	Réseau des différences finies applique sur une coupe transversale du réservoir	7
figure 4	Structure de réseau azimuthal pour l'analyse d'une flamme ponctuelle	8
figure 5	Répartition des vitesses de propagation du gaz dans un réservoir équipé de deux valves de sécurité	11
figure 6	Comparaison entre la pression enregistrée dans un wagon-citerne RAX 201 et la tension de vapeur saturante du propane	13
figure 7	Évolution de la couche isothermique	16
figure 8	Tracé de Larson-Miller sur les contraintes de rupture d'après le tableau 4-2 (pour acier TC-128-B)	19

1. INTRODUCTION

L'établissement d'un modèle de simulation pour une situation physique aussi complexe que le comportement d'un réservoir de propane exposé à un incendie, nécessite l'élaboration simultanée de modèles mathématiques pour les nombreux éléments présents, leurs réactions et leurs intéractions ainsi que des moyens à employer pour prévoir, de façon assez précise, le comportement du modèle à partir de ces données mathématiques. L'efficacité de la méthode peut être évaluée par comparaison des résultats théoriques et des résultats réels issus des mesures précises effectuées. Afin d'améliorer la fidélité des résultats, des modèles mathématiques hautement élaborés peuvent sembler nécessaires, mais cette tendance au raffinement doit être tempérée par la nécessité de parvenir à une solution, à un coût et dans des délais optimums.

Le modèle de simulation proposé et décrit dans ce rapport, repose sur des modèles mathématique qui englobent les facteurs de première et de seconde importance, influant le comportement du système étudié et débouche sur des applications informatiques possibles pour n'importe quel ordinateur, à moyenne ou grande unité centrale, utilisant des techniques éprouvées d'analyse numérique. En conséquence, un programme d'ordinateur élaboré à partir de ce rapport doit être "transférable" et permettre de prévoir de façon assez précise, le comportement d'un wagon-citerne soumis à un feu.

Le rapport fait ressortir les secteurs pour lesquels on dispose de trop peu d'informations sur les propriétés ou le comportement de certains éléments pour pouvoir élaborer un modèle entièrement satisfaisant. De plus, le rapport présente certains facteurs, laissés de côté parce qu'ils étaient considérés, au départ, de troisième importance, mais qui peuvent devoir être réanalysés ultérieurement.

Ce faisant, le programme d'ordinateur élaboré a partir du rapport devrait fournir des données d'une qualité suffisante pour être immédiatement utilisé dans l'étude d'une grand variété de wagons-citernes, bénéficiant de protections thermiques de qualités différentes et ayant des comportements prévisibles d'après le type et l'intensité du feu (fig. 1). Même s'il peut être nécessaire de raffiner les modèles à la suite d'autres données expérimentales, nous considérons que tous les facteurs importants et applicables ont été pris en compte dans ce modèle. Le processus par lequel le dispositif EXPLOSAFE, modifie le comportement thermique du réservoir demeure encore mal connu, comme nous le verrons plus loin.

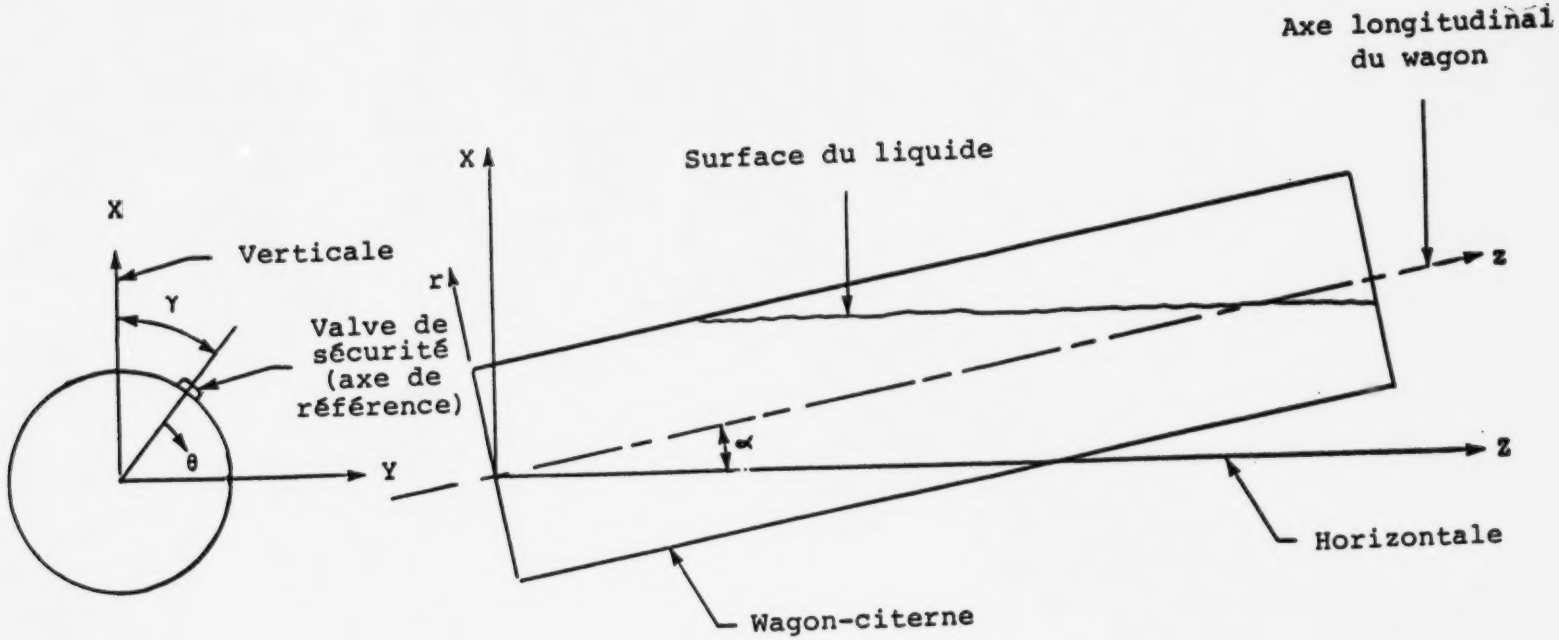


figure 1 Systèmes de coordonnées terrestres (X,Y,Z) et de référence du wagon (r,θ,Z) mettant en évidence les angles de roulis et de tangage, γ et α.

2. OBJET DU MODÈLE

Le premier objectif du programme élaboré à partir du présent modèle de simulation est de prévoir les variations de pression à l'intérieur d'un wagon-citerne GPL, ou d'une maquette, à la suite d'une exposition à un incendie (flamme directe ou enveloppe de feu) ainsi que l'évolution de la température en certains points de la paroi du réservoir. En second lieu, le programme doit permettre d'établir, par déduction, si la paroi risque de céder et, le cas échéant, la région de la rupture ainsi que la quantité de propane restant dans le réservoir au moment de la rupture. Une évolution caractéristique des températures est représentée à la figure 2;, celles-ci ont été mesurées lors des essais au DRES sur une maquette au 1/5eme.

La maquette du wagon permet d'étudier les configurations avec protection thermique passive interne et externe (non ablative) et de reproduire la position du wagon, en roulis et en tangage. La paroi du réservoir peut être soumise à une température uniforme (enveloppe de feu) ou à des températures différentes (flamme ponctuelle). Dans le cas d'une flamme ponctuelle, il est possible de spécifier la vitesse de propagation, la température et la distance de la flamme par support au réservoir.

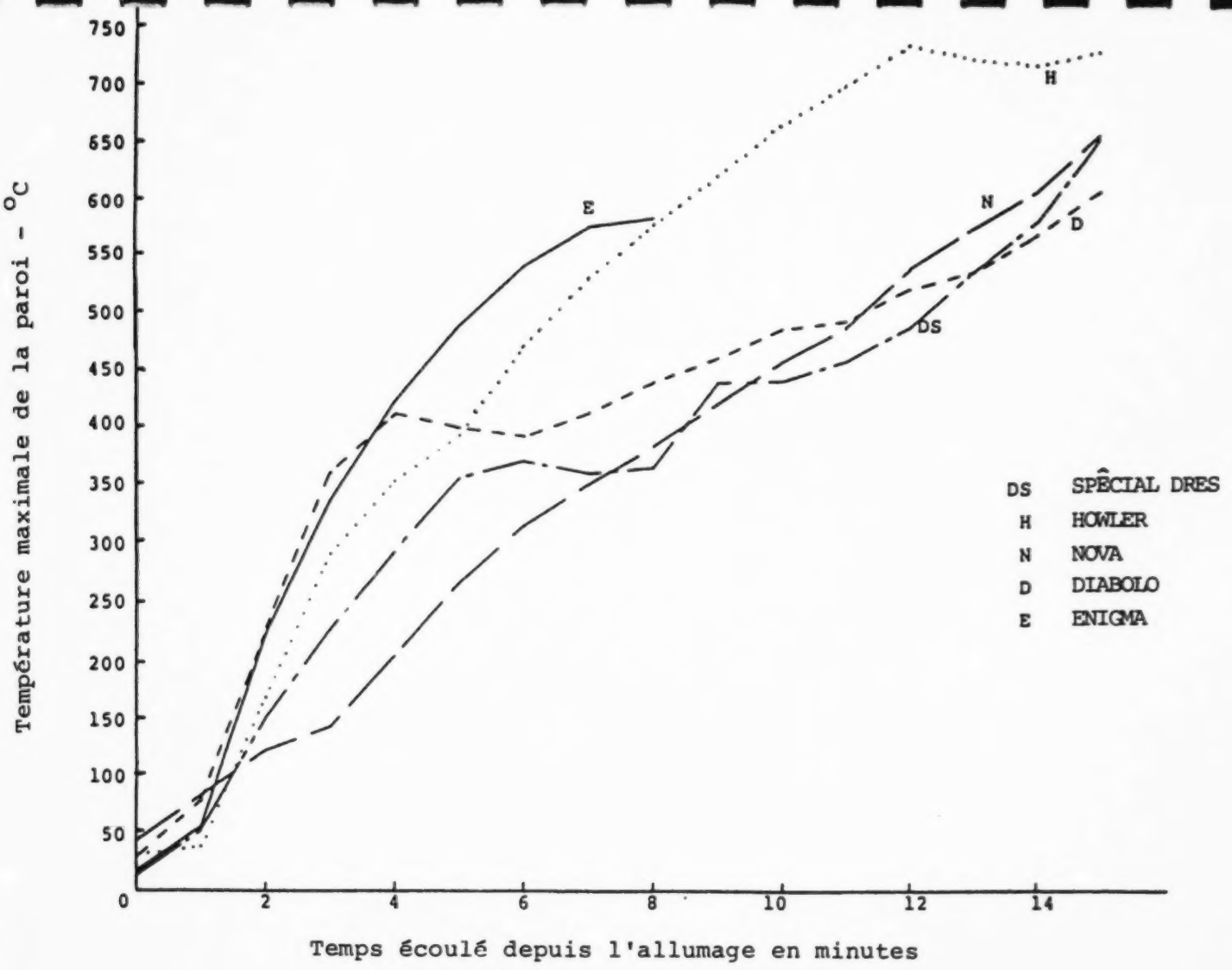


figure 2 Évolution de la température maximale de la paroi en fonction du temps (pour tous les tests)

3. STRUCTURE DU MODÈLE

Le modèle global de simulation s'appuie sur les trois sous-modèles spécialisés que voici.

3.1 Modèle thermique

Le modèle thermique présente les caractéristiques géométriques et de transfert thermique du réservoir, de son contenu, ainsi que de la source de chaleur à laquelle le wagon est soumis. Il décrit les mécanismes de transfert de chaleur, leur interaction, les conditions limites, ainsi que les techniques informatiques devant permettre de résoudre les équations.

3.2 Modèle thermodynamique

Le modèle thermodynamique présente les caractéristiques P-V-T du propane à l'état liquide ou gazeux, ainsi que l'équilibre entre les deux états dans le réservoir. Il reproduit le phénomène de stratification du liquide à cause de la température ainsi que la conséquence de cette stratification sur la densité moyenne du liquide et sur la pression à l'intérieur du réservoir. Le modèle étudié établit le débit, à hauteur de la valve de sécurité, du propane à l'état liquide ou gazeux.

3.3 Modèle structural

Le modèle structural décrit le comportement de la paroi du réservoir soumise à des températures et des pressions dues au feu. En particulier, ce modèle est une méthode pour prévoir la rupture de la paroi du réservoir.

Pour chacun des deux premiers modèles, on a considéré les effets d'une protection thermique, de sorte que ces modèles varient selon la configuration du réservoir (normal ou protégé). En outre, les modèles thermodynamiques sont modifiés lorsque la valve de sécurité est ouverte, puisque le système passe de l'état fermé à ouvert.

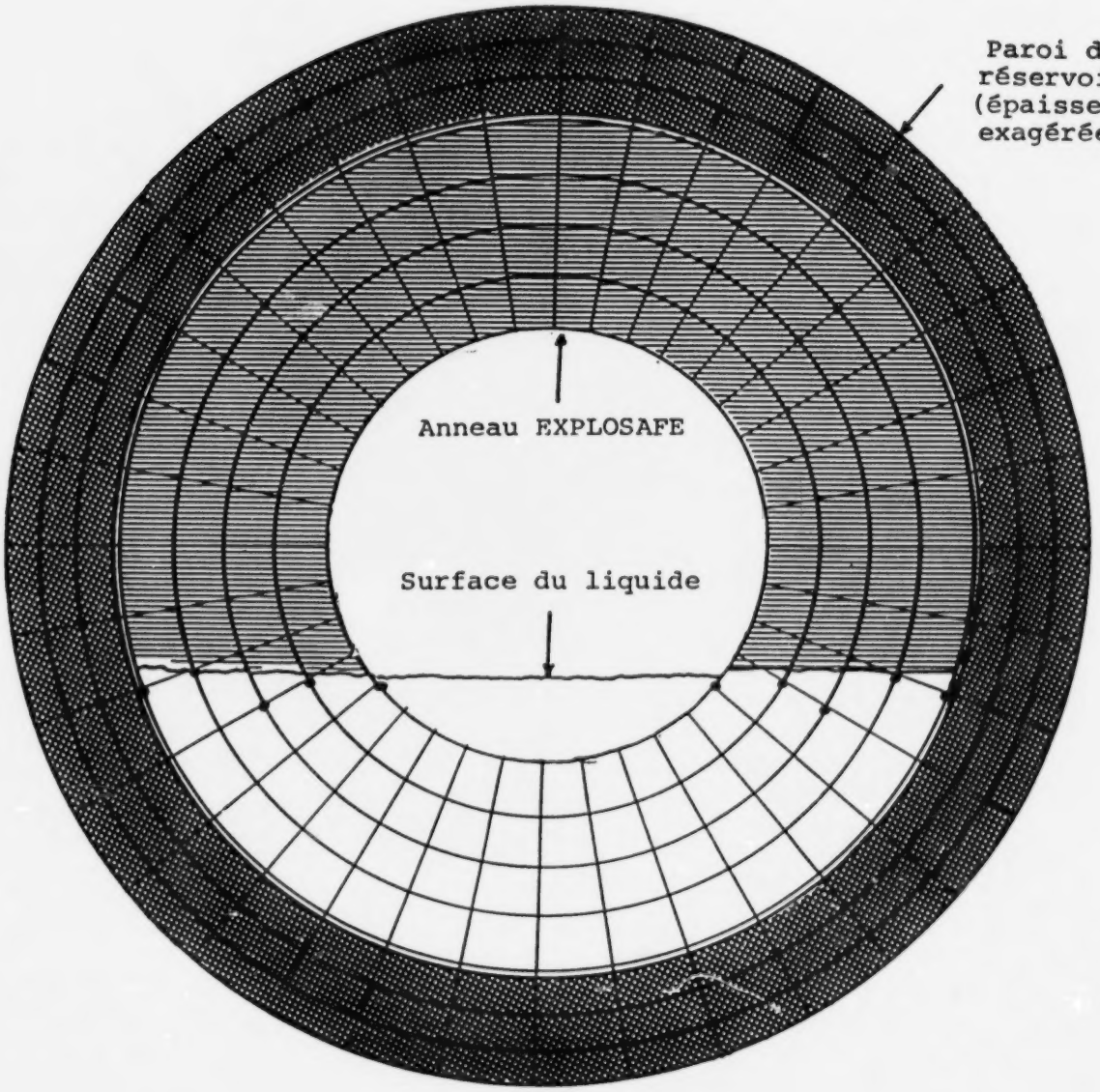
4. REPRODUCTION THERMIQUE DU TRANSFERT TRANSITOIRE DE CHALEUR

4.1 Conduction

Un réseau de points nodaux sera utilisé pour représenter les équations de transfert transitoire de chaleur tridimentionnelles en coordonnées cylindriques avec les différences finies. La figure 3 montre ce réseau projeté sur une section circulaire du réservoir. Les techniques explicite, implicite et de Crank-Nicholson ont été employées pour définir ces différences finies. Le créneau de temps nécessaire pour arriver à une solution assez précise avec la formulation explicite fut trouvé trop court pour être vraiment pratique, bien que cette méthode ne demandait qu'une mémoire réduite. La méthode implicite complète tridimentionnelle, nécessitant la résolution simultanée d'équations pour chaque point nodal, a besoin d'une mémoire trop importante dans la plupart des cas intéressants. Toutefois, si l'on fait abstraction des conductions longitudinales (en comparaison avec les conductions radiales et circonférentielles), n'importe quel ordinateur, de taille moyenne ou grande, a la capacité de mémoire requise pour parvenir à un modèle réaliste. La formulation de Crank-Nicholson donne des résultats oscillatoires bornés, qui ne sont pas valables pour nos applications.

C'est pour toutes ces raisons que nous avons retenu la méthode implicite de formulation des différences finies pour toutes les analyses dans le cas de l'enveloppe de feu, en prenant la conductivité longitudinale égale à la zéro, de sorte que l'équation ne comporte que des termes r-θ. Étant donné que les gradients longitudinaux de température sont faibles, ainsi que la conduction longitudinale pour de petits angles de cabré, cette simplification n'affecte pas beaucoup la précision du résultat.

Dans le cas de flammes ponctuelles la méthode de résolution dépendra de la taille de la flamme. Une flamme générée par une valve de sécurité fuyante peut complètement envelopper un réservoir, la méthode appliquée sera alors la même que pour les enveloppes de feu. Pour une petite flamme ponctuelle, on a recours à une méthode complète tridimentionnelle, avec les formules implicites des wagons-citernes non protégés. Un réseau grossier peut alors être employé. La figure 4 montre un exemple de structure en trame azimutale pour ce genre de feu.



- Point lié, à la température du liquide

- Point non utilisé pour le modèle des différences finies (partie clarie)

figure 3 Réseau des différences finies applique sur une coupe transversale du réservoir

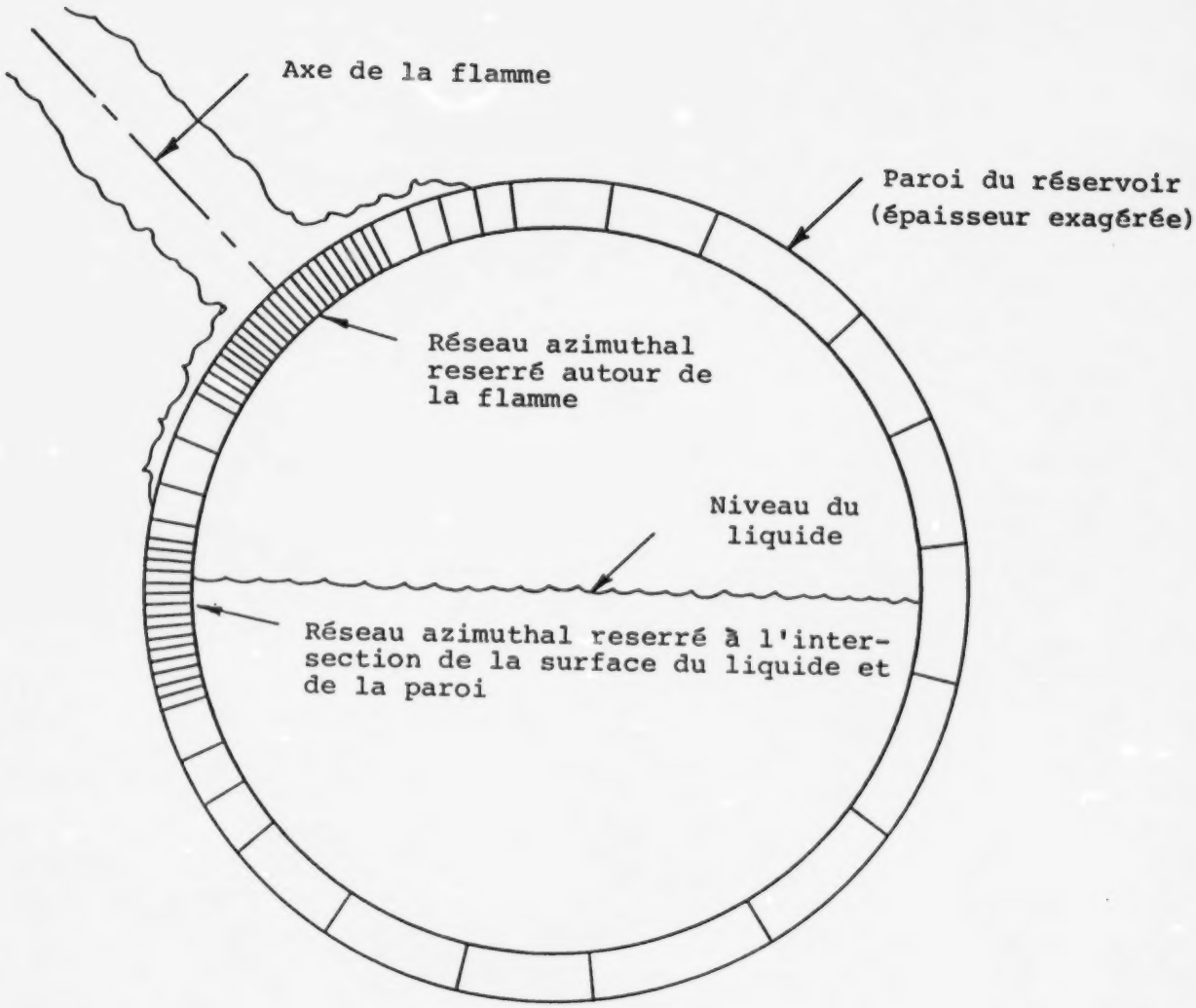


figure 4 Structure de réseau azimuthal pour l'analyse d'une flamme ponctuelle

Toutefois, dans le cas d'une flamme ponctuelle léchant un réservoir protégé (EXPLOSAFE ou isolation thermique), la méthode implicite exige une mémoire trop importante et il faut alors avoir recours à une méthode explicite, même s'il faut plus de temps pour parvenir à la solution.

Quelle que soit la solution retenue, l'utilisateur aura toute la latitude voulue pour déterminer l'espacement du réseau, de même qu'un espacement variable pour maintenir une précision dans les zones où les gradients de température sont élevés. Pour des réservoirs calorifugés, la géométrie et les propriétés thermiques de la protection contre la chaleur et les explosions, doivent être fournies par l'exploitant. Dans le cas d'EXPLOSAFE, qui est hautement anisotrope, les conductivités sur les trois grands axes sont très différentes. Toutefois, les analyses et les expérimentations conduites par DE ont montré comment on pouvait calculer ces conductivités, et l'on dispose d'ailleurs de valeurs pour un échantillon de ce matériau.

4.2 Radiation

Le modèle radiatif se présente lorsque la flamme se trouve à l'extérieur du réservoir. À l'analyse de ce qui a été écrit sur le sujet, il ressort que la flamme peut être considérée comme opaque et "grise", avec une émissivité avoisinant 1, et, puisqu'elle enveloppe le réservoir, le flux de chaleur radiatif peut être facilement établi si les températures de la flamme et de la surface sont connues. La température de la flamme doit être donnée par l'utilisateur; elle peut être uniforme ou varier d'un point à l'autre, à la surface du réservoir.

L'importance de l'effet radiatif de la surface intérieure sèche et chaude du réservoir sur la surface liquide ainsi que les effets d'absorption par la vapeur ont été étudiés. L'effet radiatif n'est pas à négliger, bien qu'il soit plus faible que la radiation due à la flamme externe.

Le calcul de la radiation totale, dont "l'auto-irradiation" de la surface interne du réservoir, est complexe; on calcule le flux radiatif en supposant que la surface intérieure sèche du réservoir est isothermique et qu'elle rayonne seulement vers le propane. L'absorption par la vapeur n'est pas prise en compte, puisqu'elle ne représente qu'un peu plus de 10% de la radiation quittant la surface du réservoir.

L'effet des radiations lorsque le réservoir est équipé d'un revêtement EXPLOSAFE a également été étudié, les résultats prouvent qu'il est négligeable, sauf, peut-être, dans le cas où les plaques en couches sont disposées pour former un cylindre.

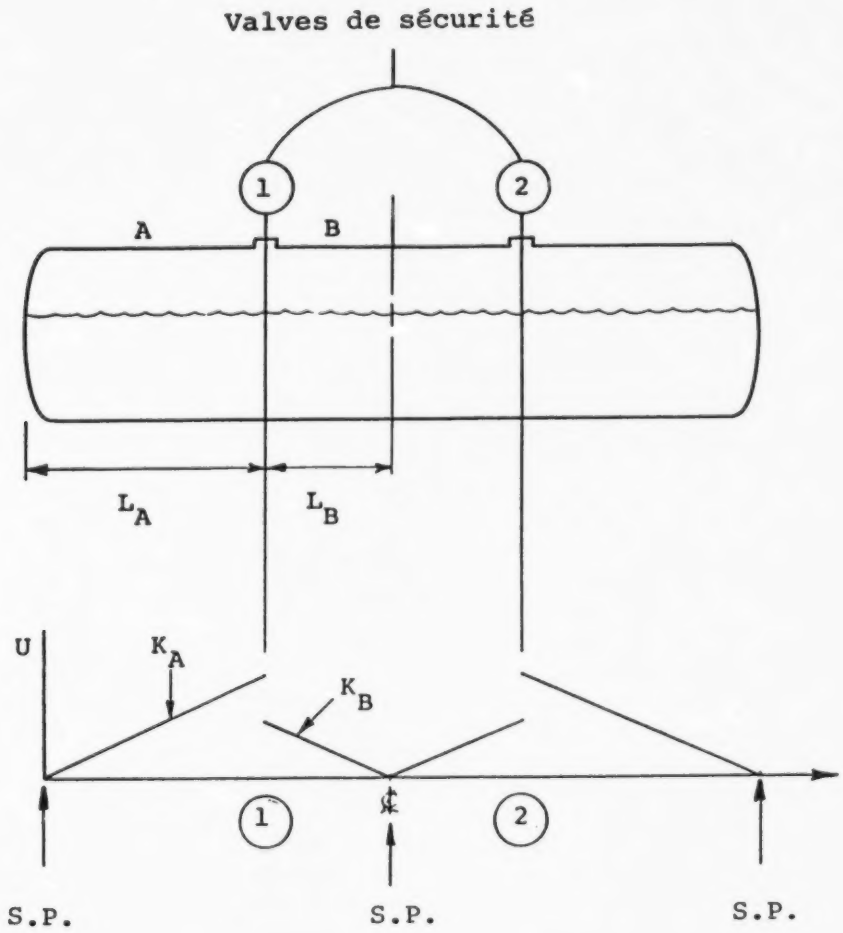
4.3 Convection

Le phénomène de convection de la flamme sur le réservoir a été examiné attentivement. Étant donné que le flux de chaleur convectif est négligeable par rapport au flux radiatif, on a élaboré une méthode pour prévoir ces valeurs. La moindre variation dans l'emplacement à la circonférence est prévue, mais elle doit alors être ignorée étant donné la prédominance du flux radiatif (et l'incertitude quant à la température réelle de la flamme pour cette radiation).

La convection à l'intérieur du propane liquide n'a pas été modelisée. Lors des dix premières minutes, approximativement, d'un feu typique, le liquide n'est pas isothermique. Il est alors stratifié pour empêcher toute convection dans sa masse. Le principal effet de la convection sur la paroi du réservoir est de créer cette stratification. Le modèle thermodynamique traite cette stratification de façon empirique.

Il en est de même pour le gaz qui est stratifié empêchant ainsi toute convection naturelle. Ce processus n'existe donc pas dans le cas du propane. Cependant, l'effet d'une convection forcée, comme c'est le cas lorsque le gaz s'échappe par la vanne de sécurité quand celle-ci est ouverte, est étudié. La répartition des vitesses de propagation du gaz dans un réservoir, équipé de deux valves de sécurité, est illustrée à la figure 5. L'effet sur la température de la paroi est faible, mais l'effet sur le débit de ventilation n'est pas à négliger, le gaz pénétrant dans la valve étant surchauffé.

Un dernier phénomène convectif doit être pris en considération si, comme il semble, l'effet de protection du système EXPLOSAFE ne peut pas être reproduit sur le modèle utilisant les effets conducteurs seulement. Ce phénomène est celui de la convection par intermittence qui apparaît lorsque la pression du réservoir varie, sous l'effet de l'ouverture et de la fermeture de la valve de sécurité. Ce phénomène peut devenir assez important pour refroidir la paroi intérieure du réservoir au début du feu. La convection dans le revêtement EXPLOSAFE, dans des conditions de pressions constantes, risque fort d'être annulée par la résistance qu'offre le trémis au déplacement du liquide.



Point d'arrêt - S.P.

figure 5 Répartition des vitesses de propagation du gaz dans un réservoir équipé de deux valves de sécurité

5. MODÈLES THERMODYNAMIQUES

5.1 Modèles avant ouverture de la valve

Avant que la valve de sécurité ne s'ouvre, toute augmentation de température, provoque une augmentation de l'énergie interne du système. Pendant cette période, le volume non occupé par le liquide diminue et, si le réservoir est rempli à 85% ou plus il peut alors être saturé (aucune vapeur). Ce volume libre, ainsi que le volume du liquide, est déterminé par l'énergie interne; la masse totale est connue et, pour une énergie interne donnée, il est possible de déterminer la masse de liquide et de vapeur en équilibre. Toutefois, le liquide est généralement stratifié en température (et en densité), si bien que l'évaluation de l'énergie interne doit être faite par intégration, plutôt que par sommation.

Il est impossible de calculer le gradient de température dans le liquide stratifié d'après les premiers principes, aussi doit-il être entré par l'utilisateur, d'après les valeurs expérimentales trouvées dans ce genre de situation.

À l'examen d'un diagramme de pression-température d'un test significatif, il ressort que l'ouverture prématurée de la valve de sécurité (généralement deux minutes après le début du feu) est due, non pas au propane, mais à l'éthane et au propylène contenus dans le mélange. La force de pression exercée par ces hydrocarbures légers, ajoutée à celle du propane, fait que la pression totale est bien supérieure à ce qu'elle serait si le propane était seul. Cependant, en quelques minutes ces produits entrent en ébullition et sont évacués comme le montre la fig. 6 sous l'effet de la pression exercée par le gaz propane, laquelle est alors égale à la pression relevée dans le réservoir. Puisque cet "excès de pression" se produit lorsque la paroi est encore froide, son effet sur la structure et sur la durée de vie du réservoir est négligeable, aussi le modèle DE ne tient pas compte de ce gaz.

Dès lors, le modèle pour ordinateur ne reproduira pas cette ouverture prématurée. (Une méthode simple a été développée pour reproduire cet effet, elle peut être fournie si l'utilisateur a besoin de ce degré de précision.)

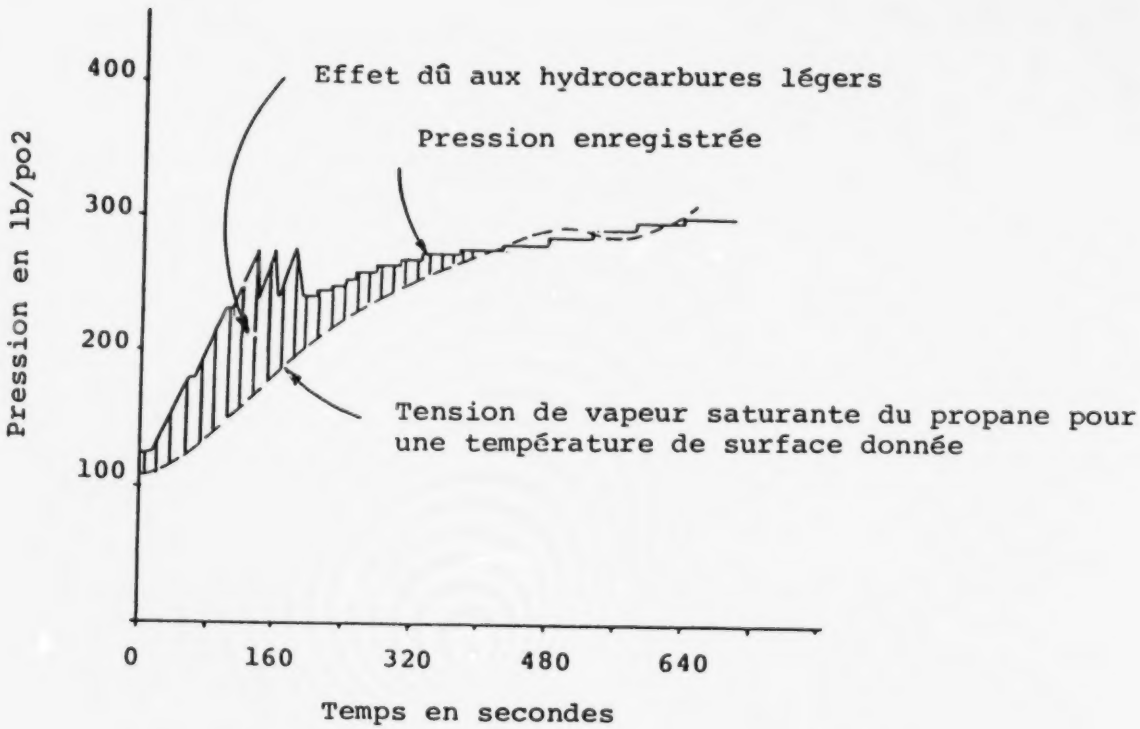


figure 6 Comparaison entre la pression enregistrée dans un wagon-citerne RAX 201 et la tension de vapeur saturante du propane

Un des buts principaux du modèle thermodynamique est de prévoir le niveau du liquide en fonction du temps. Si l'équilibre thermique est atteint, il est possible d'atteindre cet objectif en déterminant le rapport de masse vapeur liquide qui est directement lié à la valeur exacte de l'énergie interne, laquelle est tirée de l'analyse thermique. Cependant, dans les dix premières minutes d'un essai sur un réservoir non protégé, le liquide est stratifié; il est beaucoup plus chaud en surface qu'au fond. On n'a pu trouver aucune méthode pour connaître, à l'avance, le degré de stratification, mais quelques relations empiriques ont été développées d'après le peu de tests disponibles. Ce modèle exige donc que le gradient de température soit entré par l'utilisateur. On suppose que ce gradient est en surface avant l'ouverture de la valve et qu'il s'étend vers le fond à mesure que la chaleur pénètre dans le système. La fraction d'énergie ajoutée qui pénètre pour augmenter l'énergie du liquide doit également être spécifiée par l'utilisateur.

On suppose que la vapeur est isothermique et saturée, sauf dans la couche limite le long de la surface du réservoir; cette vapeur surchauffée sert uniquement à déterminer l'enthapie du gaz lorsqu'il quitte le système, et n'est donc pas retenue pour l'élaboration de ce modèle.

Ceci étant, la profondeur du liquide peut être déterminée d'une manière univoque, bien qu'avec quelques difficultés, à partir de la température en surface. Il est également possible de déterminer l'énergie interne du système à partir de la valeur de saturation de l'énergie interne spécifique du liquide en l'absence de données sur son sous-refroidissement. On peut donc dresser un tableau, avant le début des analyses thermiques, donnant la profondeur du liquide, l'énergie du système et la pression dans le réservoir en fonction de la température à la surface du liquide et de la vapeur. Ce tableau peut être utilisé pour déterminer le niveau du liquide d'après le résultat de l'analyse du modèle thermique, et ce à chaque étape.

Les seules modifications à apporter à ce modèle interviennent lorsque le réservoir est équipé d'un revêtement EXPLOSAFE. Il y a une légère modification de la capacité calorifique et du volume qui est due à l'EXPLOSAFE lui-même. Il faut également tenir compte de la surchauffe du revêtement et de la formation de vapeur, reliés à EXPLOSAFE, sur les températures calculées pour ce modèle. Ce dernier effet peut être vu comme une diminution apparente de l'énergie que le feu fournit au système.

5.2 Modèles après ouverture de la valve

Deux types de modèles sont nécessaires pour décrire ce qui se produit après l'ouverture de la valve: un modèle pour le système ouvert lui-même, et un modèle pour le débit dans la valve.

Dans le cas du système ouvert, on a recours à une équation d'énergie instable au lieu de l'équation du système fermé pour déterminer l'énergie interne du contenu. Le gradient de température à la surface du liquide, tel que décrit précédemment, est fourni par l'exploitant; il est employé pour décrire la stratification du liquide et s'applique au liquide entre deux couches thermiques, comme le montre la figure 7. La couche supérieure est à la température de saturation correspondant à la pression du réservoir, la couche inférieure est à la température initiale et la couche du milieu est stratifiée au gradient donné. Le surplus d'énergie provenant de la flamme déplace cette couche médiane vers le bas jusqu'à la couche inférieure; à la fin, tout le liquide est isothermique.

Lorsque le liquide et la vapeur sont isothermiques et saturés, la profondeur du liquide est directement déterminée d'après l'énergie interne. Celle-ci dépend en fait de la vitesse à laquelle la masse et l'enthalpie quittent le réservoir par la valve de sécurité.

Le débit dans la valve de sécurité varie selon que la valve est immergée ou non, ce qui dépend du niveau de liquide et la position du réservoir. Lorsque la valve est saturée en vapeur, on suppose qu'il n'y a aucun phénomène de condensation à l'intérieur de celle-ci et que le débit en est diminué. D'après certaine sources, le coefficient de débit est de 0.87 pour une valve de sécurité typique. Le débit est alors déterminé à partir de l'état stable de la vapeur pénétrant dans la valve. La température d'arrêt est déterminée d'après la valeur de saturation à laquelle on ajoute l'effet de la chaleur, à travers la paroi, sur la vapeur.

Lorsque la valve est immergée, un flux en deux temps la traverse, ce débit dépend de la constance de l'équilibre thermique lorsque la pression chute dans la valve. Cette détente étant assez progressive à hauteur de la valve et les pièces métalliques de celle-ci favorisant la production de vapeur, l'hypothèse d'un flux équilibré permet de prévoir le débit d'une manière assez précise. On dispose de données sur l'équilibre critique mass/flux en fonction de la pression d'arrêt, ainsi que sur les coefficients de débit pour les valves les plus répandues. L'utilisateur doit fournir une courbe de variation de pression à hauteur de la valve.

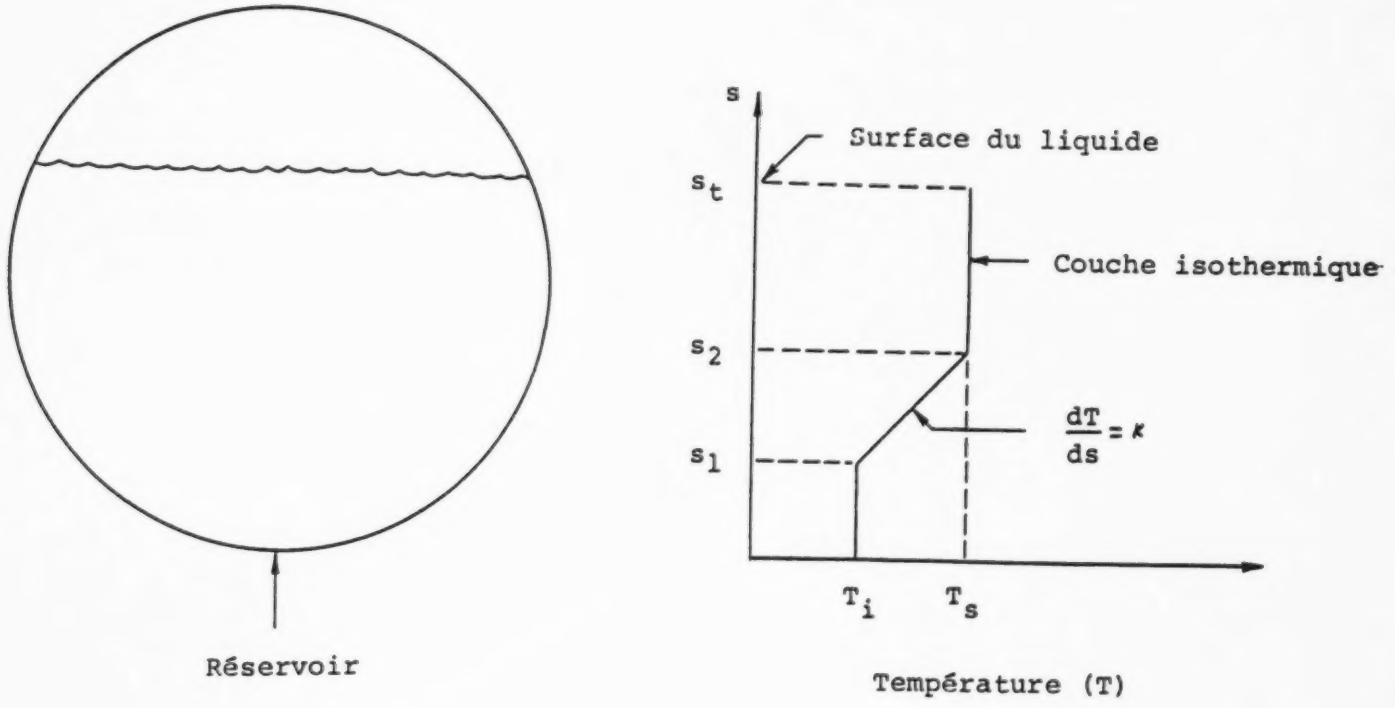


figure 7 Évolution de la couche isothermique

6. MODÈLE STRUCTURAL

Le but du modèle structural est de prévoir si la paroi du réservoir va céder ou non et, dans l'affirmative, à quel endroit et quand. Pour cela, on a retenu certains critères que l'on a appliqués en des points particuliers de la paroi ou en des points dont la température était supérieure à la température précalculée.

Trois critères de rupture ont été retenus comme envisageables et deux ont été proposés en tant que modèles. Le critère de von Mises, basé sur l'énergie de distorsion maximale, est applicable si la rupture est causée par un dépassement de la limite de rupture de la paroi en acier du réservoir. La technique de corrélation par incrémentation de Larson-Miller est employée pour les ruptures dues au fluage et à la contrainte. En fait, puisqu'on peut déterminer toute rupture imputable aux hautes températures ou à un dépassement de la charge de rupture par la technique Larson-Miller, montrée sur la figure 8, ce critère de rupture pourrait s'appliquer aux deux cas. Néanmoins, la durée du test pour un essai de traction à haute température n'est généralement pas précisée, de sorte que l'application de la technique Larson-Miller sur de courtes périodes est généralement imprécise. C'est la raison pour laquelle on a retenu deux méthodes, dont la première pour prévoir les ruptures.

Les contraintes étudiées d'après ces critères sont dues aux forces de pression - efforts circonférentiel et longitudinal sur la paroi cylindrique. On fait fi des contraintes thermiques puisque la déformation du plastique précède toujours la rupture de n'importe quel réservoir en acier, on les retrouve donc dans n'importe quelle déformation.

La conception et la technique de fabrication des extrémités de réservoir ont été étudiées d'après les analyses de contraintes.

On est arrivé à la conclusion qu'une rupture se produirait toujours à la périphérie avant les extrémités, ce qui a été confirmé par des résultats des tests. En conséquence, même si l'on a pu développer une technique relativement simple sur l'analyse des contraintes pour les extrémités du réservoir, celle ci n'est pas employée dans le modèle initial.

Nous avons plutôt retenu une méthode d'analyse par éléments finis pour ce problème. On en conclut que cette version du programme devrait être très élaborée puisqu'elle comprendrait: l'étude des efforts, des distorsions, des déformations plastiques ainsi que les propriétés inhérentes à la température. Même si de tels programmes existent, ils exigent des ordinateurs puissants et sont dispendieux. L'introduction d'une telle méthode diminuerait la souplesse d'application du programme (interchangeabilité) et demanderait des compétences poussées dans l'analyse des contraintes de la part de l'utilisateur. Cette option a donc été repoussée au profit de la version initiale de la simulation.

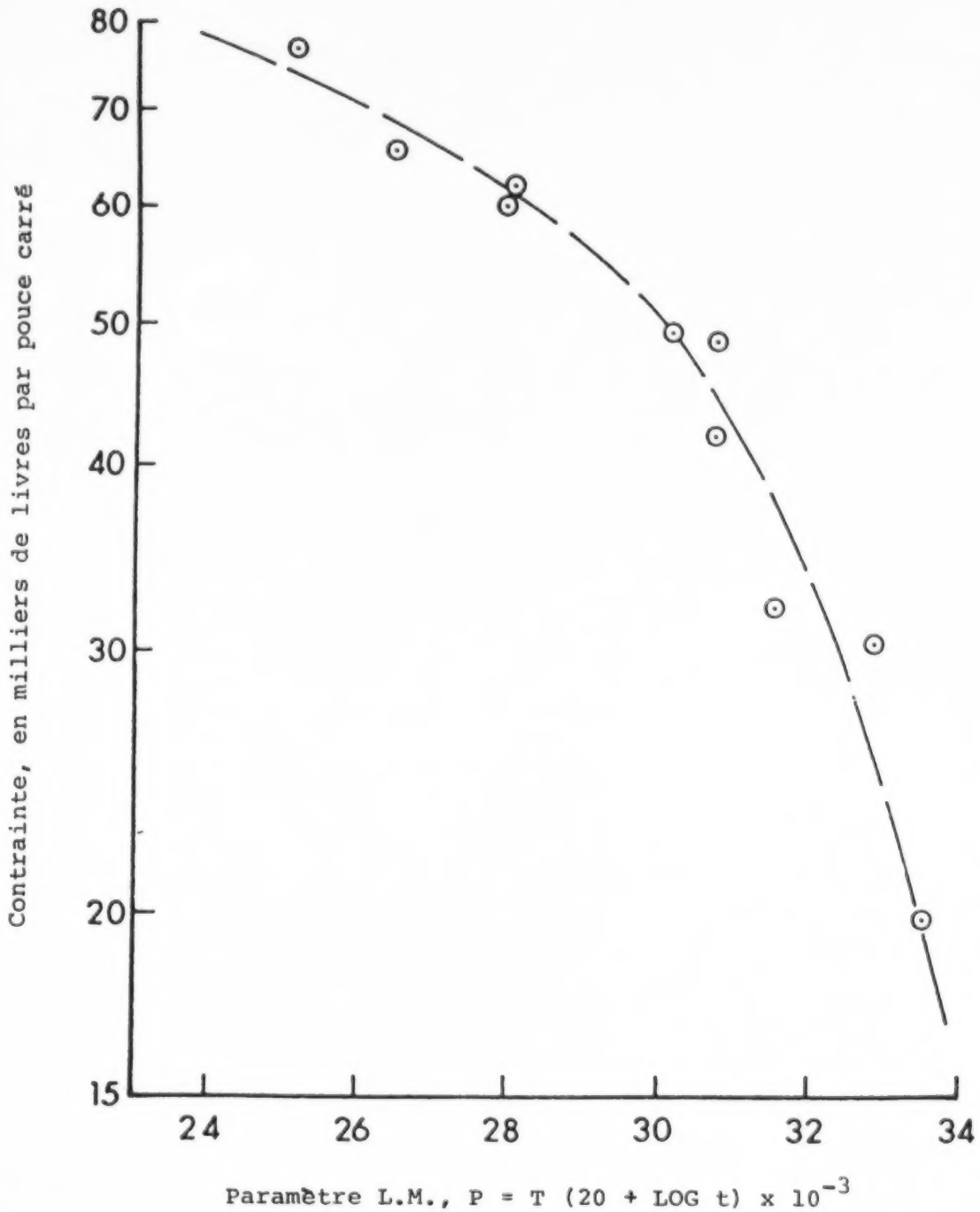


figure 8 Tracé de Larson-Miller sur les contraintes de rupture d'après le tableau 4-2 (pour acier TC-128-B)

T - température; t - vie (temps)

7. CONCLUSION

Le modèle de simulation décrit précédemment est suffisamment complet de manière à reproduire le plus fidèlement possible tous les cas d'incendie envisageables pour des wagon-citernes. Les interventions de l'utilisateur ont été réduites au minimum et les données que ces derniers doivent fournir ont été choisies, dans la mesure du possible, pour qu'elles soient facilement accessibles à l'utilisateur. Par exemple la température de la flamme est retenue à la place du flux de chaleur en surface.

Le modèle est beaucoup plus complet que tout ce qui a pu ce faire à ce sujet jusqu'a présent. Cependant, il permet à l'exploitant de voir quels sont les phénomènes les plus importants, afin de diriger les recherches pour les mettre à jour et d'inclure les résultats de l'étude sans avoir à restructurer le programme.